

FIȘA DISCIPLINEI
Fizica moleculei
 Anul universitar 2024-2025

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Fizică
1.3 Departamentul	Departamentul de Fizică Biomoleculară
1.4 Domeniul de studii	Fizică; Științe ingineresti
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu	Fizică, Fizică Informatică, Fizică Medicală; Fizică Tehnologică

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Fizica Moleculei	Codul disciplinei	FLR1506
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. dr. Vasile Chiș		
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. dr. Vasile Chiș		
2.4 Titularul activităților de laborator	Lect. dr. Ștefania Iancu		
2.5 Anul de studiu	III	2.6 Semestrul	V
		2.7 Tipul de evaluare	E
		2.8 Regimul disciplinei	DS

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/ laborator/ proiect	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI):					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri (mai mare sau egal cu nr. total ore prevăzut în calendarul disciplinei pentru temele de control)					16
Tutoriat (consiliere profesională)					6
Examinări					8
Alte activități:					-
3.7 Total ore studiu individual	70				
3.8 Total ore pe semestru	126				
3.9 Numărul de credite	5				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	Mecanică cuantică, Electricitate, Termodinamică și căldură, Calcul diferențial și integral
4.2 de competențe	Elementare de conduită în laborator

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Sală adecvată, tablă, videoproiector Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise
5.2 de desfășurare a seminarului	Sală adecvată, tablă, videoproiector, rețea de computere; Studentii se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise
5.3 de desfășurare a laboratorului	Sală adecvată, echipament specific laboratorului, rețea de computere

6. Competențele specifice acumulate¹

Competențe profesionale/esențiale	<p>C1. Identificarea și utilizarea adecvată a principalelor legi și principii fizice într-un context dat. Identificarea și exploatarea principalelor legități, noțiuni și concepte teoretice specifice Fizicii. C2. Utilizarea de pachete software pentru analiza și prelucrarea de date. Utilizarea conexiunilor logice cu alte domenii științifice fundamentale implicate în definirea conceptelor fizicii moleculii. Utilizarea sistemelor informatice de prelucrare și gestiune a datelor.</p> <p>C3. Rezolvarea problemelor de fizică în condiții impuse, folosind metode numerice și statistice. Efectuarea experimentelor de fizică, biofizică, fizică medicală și evaluarea rezultatelor pe bazamodelelor teoretice. Asigurarea de activități suport pentru cercetare.</p> <p>C4. Aplicarea cunoștințelor din domeniul fizicii atât în situații concrete din domenii conexe, câtși în cadrul unor experimente, folosind aparatura standard de laborator. Utilizarea aplicațiilor specifice pentru prelucrarea, reprezentarea și stocarea datelor. Utilizarea aparaturii standard de laborator de cercetare sau industriale pentru efectuarea de experimente de cercetare.</p> <p>C5. Comunicarea și analiza informațiilor cu caracter didactic, științific și de popularizare din domeniul Fizicii. Dezvoltarea și folosirea de aplicații informatice și instrumentație virtuală pentru rezolvarea diferitelor probleme de fizică. Interpretarea informațiilor cu caracter fizico-medical și transmiterea lor într-o formă coerentă și accesibilă. Analiza și prelucrarea datelor din măsurători și identificarea alternativelor optime de monitorizare și analiză pentru Fizica mediului. Utilizarea pentru activități de producție, expertiză și monitorizare a fundamentelor fizicii tehnologice, a metodelor și instrumentelor specifice.</p> <p>C6. Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul fizicii. Participarea în echipe interdisciplinare (medici, fizicieni, biologici, chimiști) pentru stabilirea diagnosticului și tratamentului adecvat. Analiză și comunicarea informațiilor cu caracter științific. Coordonarea de structuri organizaționale având ca obiect de activitate proiectarea, fabricarea sau întreținerea de echipamente specifice.</p>
--	--

¹ Se poate opta pentru competențe sau pentru rezultatele învățării, respectiv pentru ambele. În cazul în care se alege o singură variantă, se va șterge tabelul aferent celeilalte opțiuni, iar opțiunea păstrată va fi numerotată cu 6.

Competențe transversale	<p>CT1. Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată. Aplicarea strategiilor de muncă eficientă și responsabilă, de punctualitate, seriozitate și răspundere personală, pe baza principiilor, normelor și a valorilor codului de etică profesională. Aplicarea, în contextul respectării legislației, a drepturilor de proprietate intelectuală (inclusiv transfer tehnologic), a metodologiei de certificare a produselor, a principiilor, normelor și valorilor codului de etică profesională în cadrul propriei strategii de muncă riguroasă, eficientă și responsabilă.</p> <p>CT2. Aplicarea tehnicilor de muncă eficientă în echipă multidisciplinară pe diverse paliere ierarhice. Identificarea rolurilor și responsabilităților într-o echipă și aplicarea de tehnici de relaționare și muncă eficientă în cadrul echipei.</p> <p>CT3. Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională. Documentarea în limba română și cel puțin într-o limbă străină, pentru dezvoltarea profesională și personală, prin formare continuă și adaptarea eficientă la noile descoperiri științifice. Identificarea oportunităților de formare continuă și valorificarea eficientă a resurselor și tehnicilor de învățare pentru propria dezvoltare.</p>
--------------------------------	---

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> Asimilarea conceptelor și formarea de competențe și aptitudini în domeniul fizicii moleculare și al spectroscopiei moleculare
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea cunoștințelor teoretice pentru înțelegerea structurii geometrice și electronice a moleculelor Dobândirea de competențe practice de lucru în domeniul spectroscopiei moleculare și al modelării moleculare

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
Curs 1-2 Introducere; Recapitulare; Orbitali atomici hidrogenoizi Orbitali atomici aproximativi Orbitali atomici de tip Slater (STO) Orbitali atomici de tip Gauss (GTO)	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore

<p>Curs 3-4 rotația moleculelor biatomice Rotatorul rigid Ecuția Schrodinger, Funcții de undă de rotație, energia nivelelor de rotație, tranziții între nivelele de rotație Reguli de selecție, momentul de dipol al tranziției, spectre de rotație; intensitatea liniilor spectrale Rotatorul nerigid Energia nivelelor rotatorului nerigid Aplicații ale spectroscopiei de rotație Spectroscopia Raman de rotație</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore
<p>Curs 5-6 Vibrația moleculelor biatomice Ecuția Schrödinger radială Oscilatorul armonic: energia nivelelor, funcțiile de undă, reguli de selecție pentru oscilatorul armonic Oscilatorul anarmonic: potențialul Morse, energia nivelelor oscilatorului anarmonic, energia de vibrație de punct zero (ZPVE). Rotația-vibrația moleculelor biatomice</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore
<p>Curs 7 Cationul H₂⁺ Coordonate eliptice Aproximația Born-Oppenheimer Aproximația LCAO pentru cationul H₂⁺</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
<p>Curs 8-9 Cationul H₂⁺ Energii orbitalilor moleculari și funcțiile de undă Tipuri de orbitali moleculari Ordinul de legătură Îmbunătățirea metodei LCAO-MO pentru cationul H₂⁺</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore
<p>Curs 10-11 Molecula de hidrogen Hamiltonianul moleculei H₂. Aproximația LCAO-MO pentru H₂ Deficiențele și îmbunătățirea metodei LCAO-MO pentru H₂ Metoda Heitler-London pentru molecula H₂ Îmbunătățirea metodei Heitler-London Starea fundamentală, starea excitată de singlet și starea excitată de triplet pentru molecula H₂</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore
<p>Curs 12 Configurații electronice ale moleculelor biatomice Forma și ordinea MO pentru moleculele biatomice Completarea MO cu electroni Configurații electronice Principiile spectroscopiei fotoelectronice</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
<p>Curs 13-14 Stări electronice ale moleculelor biatomice Termeni spectrali Stări electronice excitate Reguli de selecție pentru tranziții electronice Principiul Franck-Condon Spectre electronice de absorbție și emisie</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore

Bibliografie

1. D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry, A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, 1997
2. Atkins's Physical Chemistry, 11-th edition, Peter Atkins, Julio de Paula, James Keeler, Oxford University Press, 2017.
3. P.W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics 5-th edition, Oxford University Press, 2011
4. T. Shida, The Chemical Bond – A fundamental Quantum-Mechanical Picture, Springer, 2001
5. H. Haken, H. C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, Ed. Springer-Verlag, Berlin, London, Tokyo, 1993
6. R.G. Mortimer, Physical Chemistry, Elsevier, 2008
7. W. Demtroder, Atoms, molecules and photons - an introduction to atomic, molecular and quantum physics, Springer, 2006
W. Demtroder, Atoms, molecules and photons - an introduction to atomic, molecular and quantum physics, Springer, 2006
8. H. Haken, H.C. Wolf, Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry, Springer-Verlag Berlin, 2004
9. Antonio Hernanz Gismero, Metodos Teoricos de la Quimica Fisica, UNED Madrid, 1991
10. B.H. Bransden, C.J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall, 2003
11. J.M. Hollas, Modern Spectroscopy, John Wiley and Sons, 2004
12. V. Chiş, O. Cozar, L. David, Simetrie moleculară, Ed. Napoca Star, Cluj-Napoca, 2007
13. A. Hinchliffe, Modelling molecular structures, John Wiley and Sons, 2000
14. V.E. Sahini, M. Hillebrand, Chimie cuantică în exemple și aplicații, Ed. Academiei, București, 1985
15. I.G. Murgulescu, Introducere în chimia fizică, vol.I.1, Editura Academiei, București, 1976
16. W. Demtroder, Molecular Physics, Theoretical Principles and Experimental Methods, Wiley-VCH Verlag, 2003

	Metode de predare	Observații
8.2 Seminar		
Seminar 1 Recapitulare Modelul Bohr, Orbitali atomici hidrogenoizi, Atomul de He	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Seminar 2-3 Orbitali atomici aproximativi Orbitali atomici de tip Slater (STO) Orbitali atomici de tip Gauss (GTO). Probleme	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Seminar 4-5 rotația moleculelor biatomice Rotatorul rigid și rotatorul nerigid	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Seminar 6-7 Vibrația moleculelor biatomice Oscilatorul armonic. Oscilatorul anarmonic. Probleme.	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Seminar 8-10 Integrale moleculare Calculul integralelor de S, J și K pentru cationul H ₂ ⁺ .	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Seminar 11-12 Configurații electronice Configurații electronice ale moleculelor biatomice homonucleare Configurații electronice ale moleculelor biatomice heteronucleare	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore

Seminar 13-14 Termeni spectrali Termeni spectrali pentru molecule biatomice în stare fundamentală și în stare excitată Tranziții electronice	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
---	---	-------

Bibliografie

1. D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry, A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, 1997
2. D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Problems and Solutions to accompany Physical Chemistry, A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, 1997
3. Antonio Hernanz Gismero, Metodos Teoricos de la Quimica Fisica, UNED Madrid, 1991
4. E. Constantin, O. Cozar, Culegere de probleme de fizica moleculei, Ed. Univ. "Babeș-Bolyai", 1983
5. V. Chiș, V. Simon, N. Leopold, Fizica moleculei – Probleme, Ed Univ. "Babeș-Bolyai", 2001.
6. H. Haken, H. C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, Ed. Springer-Verlag, Berlin, London, Tokyo, 1993
7. V. Chiș, O. Cozar, L. David, Simetrie moleculară, Ed. Napoca Star, Cluj-Napoca, 2007
8. P.W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics 5-th edition, Oxford University Press, 2011
9. P.W. Atkins, Solutions Manual for Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 1983.
10. W.W. Parson, Modern Optical Spectroscopy, Springer, 2007

8.3 Laborator	Metode de predare	Observații
Prezentare lucrărilor. Instructaj de protecție. Studiul spectrului de masă al moleculelor.	Prelegere; Discuție individuală	2 ore
Studiul IR al moleculelor biatomice	Discuție individuală	2 ore
Studiul spectrelor de rezonanță magnetică nucleară (RMN)	Discuție individuală	2 ore
Studiul spectrelor de rezonanță electronică de spin (RES)	Discuție individuală	2 ore
Studiul spectrelor de absorbție electronică a moleculelor biatomice	Discuție individuală	2 ore
Studiul spectrelor de fluorescență de raze X	Discuție individuală	2 ore
Calcul spectrelor și proprietăților moleculare	Prezentare teme de cercetare. Discuții.	2 ore

Bibliografie

1. H. Haken, H. C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, Ed. Springer-Verlag, Berlin, London, Tokyo, 1993
2. E. Fodor, V. Znamirovski, O. Cozar, Lucrări practice de Fizica atomului, nucleului și moleculei, Ed. Univ. „Babeș-Bolyai“, 1973
3. O. Cozar, A. Farcaș, C. Cosma, V. Mercea, Lucrări de laborator de fizica moleculei, Ed. Univ. „Babeș-Bolyai“, 1975

9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

Conținutul disciplinei este în concordanță cu ceea ce se studiază în alte centre universitare din țară și străinătate. Pentru adaptarea la cerințele impuse de piața muncii, conținutul disciplinei a fost armonizat cu cerințele specifice învățământului preuniversitar, ale institutelor de cercetare și ale mediului de afaceri.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală (%)
10.4 Curs	Cunoștințe dobândite	Examen oral - teorie	40
		Examen scris - probleme	40
10.5 Seminar	Activitate și proiect	Elaborare proiect	10
10.6 Laborator	Activitate	Experimente realizate	10
10.7 Standard minim de performanță			
Cunoștințe fundamentale de fizica moleculei: cationul H_2^+ , molecula de hidrogen, configurații electronice și termeni spectrali pentru molecule biatomice; modele spectroscopice			

11. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)²



Data completării:
06.03.2025

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

Data avizării în departament:
16.04.2025

Semnătura directorului de departament

² Păstrați doar etichetele care, în conformitate cu [Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic](#), se potrivesc disciplinei și ștergeți-le pe celelalte, inclusiv eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă - dacă nu se aplică. Dacă nicio etichetă nu descrie disciplina, ștergeți-le pe toate și scrieți "Nu se aplică".